



TITLE:

界面の振動分光学

AUTHOR(S):

長谷川, 健

CITATION:

長谷川, 健. 界面の振動分光学. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2020, 2019: 10-10

ISSUE DATE:

2020-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/251092>

RIGHT:

界面の振動分光学

Vibrational Spectroscopic Study of Surface Chemistry

京都大学 化学研究所 分子環境解析化学領域

長谷川 健

研究成果概要

有機半導体薄膜の製膜手法として、安価で大面積に製膜できるウェットプロセスがしばしば用いられるが、ペンタセン(PEN)に代表される低分子有機半導体は有機溶媒に難溶であるため、ウェットプロセスの適用が困難である。このような材料では、可溶性の前駆体化合物の薄膜を作製した後、熱もしくは光によって転化させて、目的とする化合物の薄膜を得る前駆体法が有用である。PEN の代表的な可溶性前駆体として、熱処理により PEN に転化する 13,6-*N*-Sulfinylacetamidopentacene (SAP) がある[1]。転化が完全に進行した PEN 薄膜に関しては、X 線回折(XRD)等を用いた研究により、結晶状態や分子配向が明らかになっている[2]。しかし、SAP から PEN への熱転化反応の過程については、結晶性が低い SAP は XRD による解析が困難という背景もあり、定量的な議論が行われていない。

本研究では、結晶性によらず分子配向の議論が可能な、赤外 p 偏光多角入射分解分光(pMAIRS)法[3]を用いた検討を行った。スピンコート法により SAP 薄膜を作製し、それらを種々の温度(111~194°C)で加熱し、pMAIRS スペクトルを測定した。スペクトル変化について量子化学計算を用いて解析した結果、SAP の減少にともない PEN が増加するとともに、PEN の配向化が進行することがわかった。また、PEN のスペクトル解析により Thin-Film 相と Bulk 相の 2 種の存在が示唆された。熱転化反応における SAP および 2 種の PEN、計 3 成分の量変化を調べるため、pMAIRS スペクトルを無配向スペクトルに変換後、ケモメトリックスの一種である classical-least squares (CLS)回帰法[4]による解析を行った。その結果、転化によって PEN の Thin-Film 相と Bulk 相が同時に生成するが、最終的に Thin-Film 相がすべて高配向の Bulk 相へと構造転移することがわかった[5]。

薄膜試料の赤外バンド強度は、量だけでなく分子配向にも依存するため、ケモメトリックスの適用は困難であったが、薄膜の面内および面外のスペクトルが同一の縦軸スケールで得られる pMAIRS の特徴をうまく生かし、薄膜試料中の成分の定量的な議論に成功した[5]。

参考文献

[1] A. Afzali, et al., *J. Am. Chem. Soc.* **124**, 8812 (2002)., [2] Y. Murai, et al., *Appl. Phys. Express* **4**, 121603 (2011)., [3] T. Hasegawa, *Anal. Chem.* **79**, 4385 (2007)., [4] T. Hasegawa, *Quantitative Infrared Spectroscopy for Understanding of a Condensed Matter*. Springer, Tokyo (2017).

発表論文(謝辞なし)

[5] N. Shioya, R. Fujiwara, K. Tomita, T. Shimoaka and T. Hasegawa, *J. Phys. Chem. A* (2020) in press. (DOI: 10.1021/acs.jpca.0c00111)